

РОЗВ'ЯЗАННЯ ЗАДАЧІ ПО ЗНАХОДЖЕННЮ РОЗПОДІЛІВ КОЕФІЦІЄНТІВ ДИФУЗІЇ ДЛЯ МІКРО І МАКРО ПОР ЦЕОЛІТНОГО СЕРЕДОВИЩА

При математичному моделюванні процесів дифузійного масопереносу в неоднорідних цеолітних середовищах виникає задача чисельного знаходження розподілів коефіцієнтів дифузії. Результати розв'язання такої задачі в подальшому використовуються при моделюванні концентраційних профілів в мікро і макро порах і забезпечують більш точну відповідність модельних і експериментальних кривих.

Вихідними даними для розв'язання такої задачі є експериментальні результати досліджуваного процесу масопереносу та аналітичний розв'язок математичної моделі, що описує такий процес.

При моделюванні процесу дифузії бензолу, в якості експериментальних даних використовуються дані, отримані для цеоліту ZSM5 при допомозі сучасної методики покрокового NMR-сканування. Застосувавши спеціально розроблене програмне забезпечення, основане на аналітичному розв'язку математичної моделі процесу адсорбції бензолу в цеолітному середовищі, вдалося отримати числові залежності таких дифузійних коефіцієнтів.

На рис. 1 представлені обраховані варіації коефіцієнтів дифузії D_{inter} і D_{intra} в часі для чотирьох різних реальних відстаней z від низу середовища $z_1 = 14$ мм; $z_2 = 10$ мм; $z_3 = 7$ мм; $z_4 = 3$ мм. Як можна побачити, коефіцієнти дифузії псевдоекспоненціально зменшуються із збільшеннями часу, що є нормальним, враховуючи що збільшується загроможденість паралельно з концентрацією адсорбованих молекул. D_{inter} зменшується від $1.4 \text{ м}^2/\text{с}$ на початку адсорбції до $0.001 \text{ м}^2/\text{с}$ біля стану рівноваги. D_{intra} зменшується від 10^{-12} до $5 \cdot 10^{-14} \text{ м}^2/\text{с}$. Такі результати досить добре узгоджуються з даними з літератури.

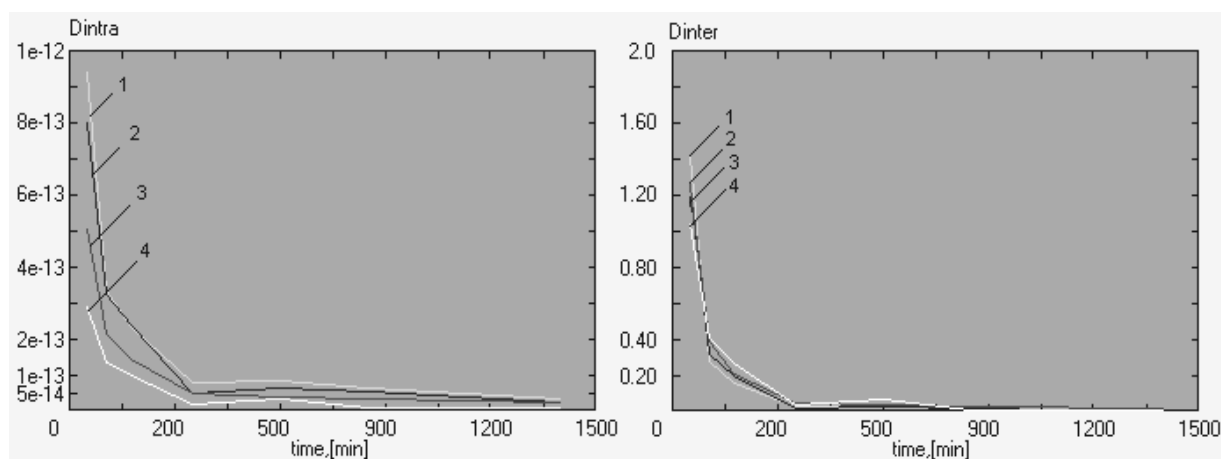


Рис. 1 – Профілі коефіцієнтів дифузії для бензолу D_{inter} та D_{intra}
1) $z = 14$ мм; 2) $z = 10$ мм; 3) $z = 7$ мм; 4) $z = 3$ мм